

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА по курсу «Data Science»

Докладчик: Матюнин Александр Александрович



Цель и задача работы

Целью работы является изучение теоретических основ и методов решения поставленной задачи. Создать и разработать приложение, которое будет предсказывать ряд конечных свойств композиционных материалов основываясь на предобученных моделях.

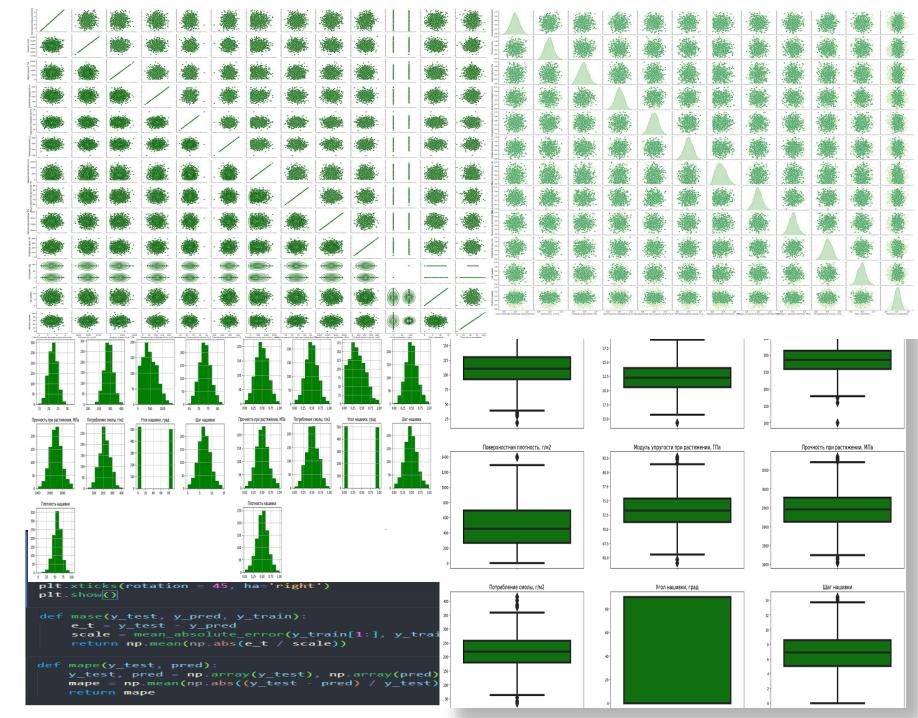
Задачи данной работы:

- Изучить теоретические основы и методы решения поставленной задачи.
- Провести разведочный анализ предложенных данных. Необходимо нарисовать гистограммы распределения каждой из переменной, диаграммы ящика с усами, попарные графики рассеяния точек. Необходимо также для каждой колонке получить среднее, медианное значение, провести анализ и исключение выбросов, проверить наличие пропусков.
- Провести предобработку данных
- Обучить нескольких моделей для прогноза
- Написать нейронную сеть
- Разработать приложение с графическим интерфейсом
- Создать репозиторий в GitHub / GitLab и разместить там код исследования



Начало работы:

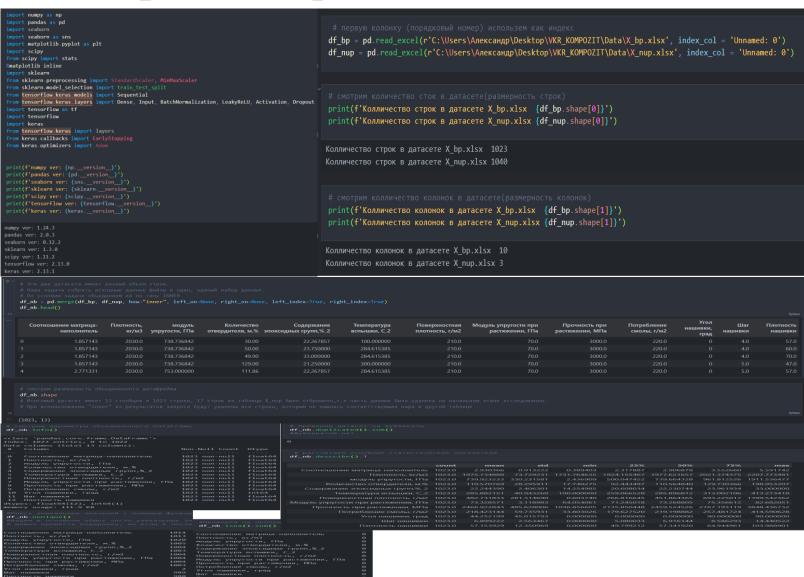
- Изучил теоретические основы, методы решения и практические составляющие
- Строил графики
- Старался делать графики в одном стиле
- Создавал понятные переменные, что бы можно было использовать в дальнейшем
- Создавал функции





Объединение файлов и разведочный анализ:

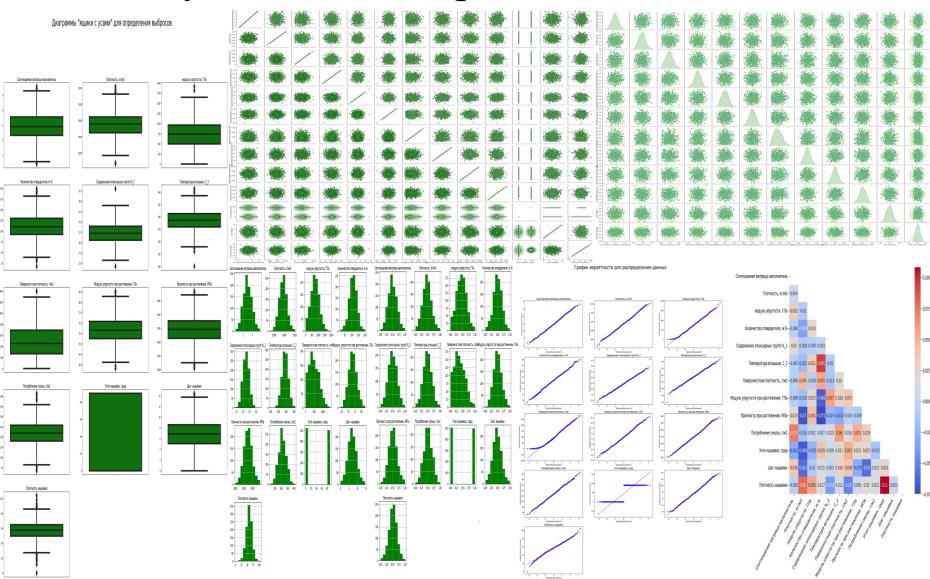
- Импорт необходимых библиотек
- Загрузка файлов
- Проверка размерности
- Объединение файлов по индексу, тип объединения INNER
- Посмотрим на данные объединенного датасета
- Изучим о нем информацию
- Проверим типы данных в каждом столбце
- Проверим на пропуски и дубликаты
- Посмотрим уникальные значения с помощью встроенной функции nunique





Визуализация «сырых» данных:

- Построение гистограмм распределения
- Диаграмм Box Plot
- Попарные графики рассеяния точек
- Тепловые карты





- Подсчет количества значений методом 3 сигм и методом межквартильных растояний
- Исключим выбросы методом 3 сигм
- Посмотрим описание

Предобработка данных:

```
fig, ax = plt.subplots(figsize = (12, 6))
count 3s = 0
                                                                          df nb clear.plot(kind = 'kde', ax = ax)
for column in df nb:
    d = df_nb.loc[:, [column]]
    zscore = (df_nb[column] - df_nb[column].mean()) / df_nb[column].std()
                                                                         <Axes: ylabel='Density'>
    d['3s'] = zscore.abs() > 3
   count_3s += d['3s'].sum()
                                                                                                                                                          — Соотношение матрица-наполнитель
print('Метод 3-х сигм, выбросов:', count_3s)

    Плотность, кг/м3

                                                                              0.4
                                                                                                                                                             модуль упругости, ГПа
                                                                                                                                                             Количество отвердителя, м.%
Метод 3-х сигм, выбросов: 24
                                                                                                                                                             Содержание эпоксидных групп,%_2
                                                                                                                                                             Температура вспышки, С_2
                                                                                                                                                             Поверхностная плотность, г/м2
                                                                              0.3

    Модуль упругости при растяжении, ГПа

                                                                                                                                                             Прочность при растяжении, МПа
count_iq = 0

    Потребление смолы, г/м2

   column in df nb:

Угол нашивки, град

    d = df_nb.loc[:, [column]]
                                                                           ام
0.2
                                                                                                                                                             Шаг нашивки
    q1 = np.quantile(df_nb[column], 0.25)

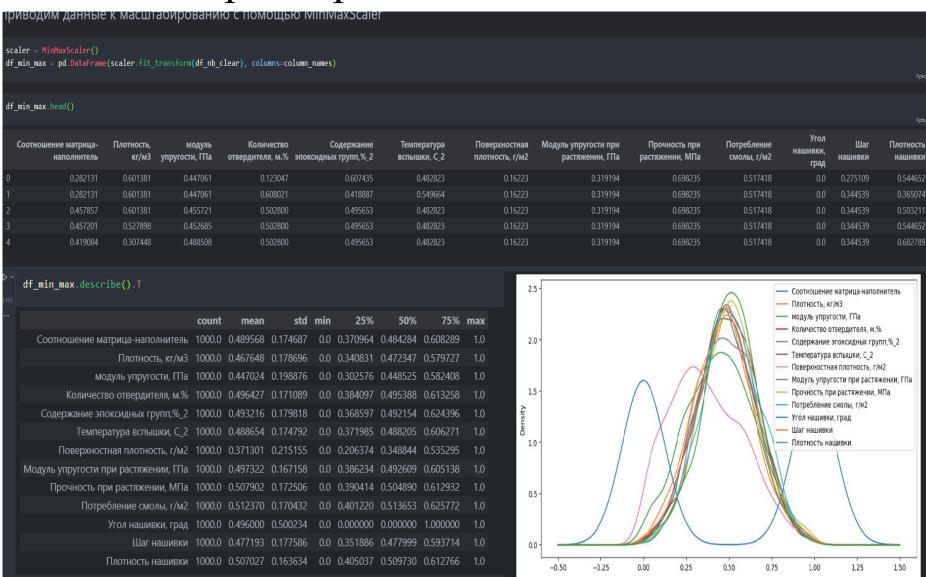
    Плотность нашивки

        np.quantile(df nb[column], 0.75)
    iar = a3 - a1
    lower = q1 - 1.5 * iqr
          = a3 + 1.5 * iar
                                                                              0.1
    d['iq'] = (df_nb[column] <= lower) | (df_nb[column] >= upper)
    count_iq += d['iq'].sum()
print('Метод межквартильных расстояний, выбросов:', count_iq)
                                                                                 -1000
                                                                                                                    1000
                                                                                                                                     2000
                                                                                                                                                      3000
                                                                                                                                                                        4000
                                                                                                                                                                                        5000
Mетод межквартильных расстояний, выбросов: 93
                                                                                                                                       minmax and mean50 cl = df nb clear.describe()
                                                                                                                                       minmax_and_mean50_cl.loc[['min', 'max', 'mean', '50%']].T
 outliers = pd.DataFrame(index=df_nb.index)
 for column in df nb:
        zscore = (df_nb[column] - df_nb[column].mean()) / df_nb[column].std()
                                                                                                                                          Соотношение матрица-наполнитель 0.389403 5.591742 2.936299
                                                                                                                                                      Плотность, кг/м3 1784.482245 2192.738783 1975.402478 1977.321002
        outliers[column] = (zscore.abs() > 3)
                                                                                                                                                  модуль упругости, ГПа 2.436909 1649.415706 738.6<u>75486 741.148111</u>
 df_nb_clear = df_nb[outliers.sum(axis=1)==0]
                                                                                                                                              Количество отвердителя, м.%
                                                                                                                                          Содержание эпоксидных групп,% 2 15.695894 28.955094
 df nb clear.shape
                                                                                                                                                Температура вспышки, C_2 173.484920 403.652861 285.957299 285.853960
                                                                                                                                             Поверхностная плотность, г/м2 0.603740 1291.340115 479.855825 450.869535
                                                                                                                                           Прочность при растяжении, МПа 1036.856605 3848.436732 2464.864198 2456.394188
                                                                                                                                                Потребление смолы, г/м2 41.048278 386.903431 218.254011 218.697660
 (1000, 13)
                                                                                                                                                    Плотность нашивки 20.571633 92.963492 57.276293 57.471971
```



- Нормализуем данные MinMaxScaler()
- Построим график плотности
- Посмотрим описание
- Выведем описательную статистику

Предобработка данных:



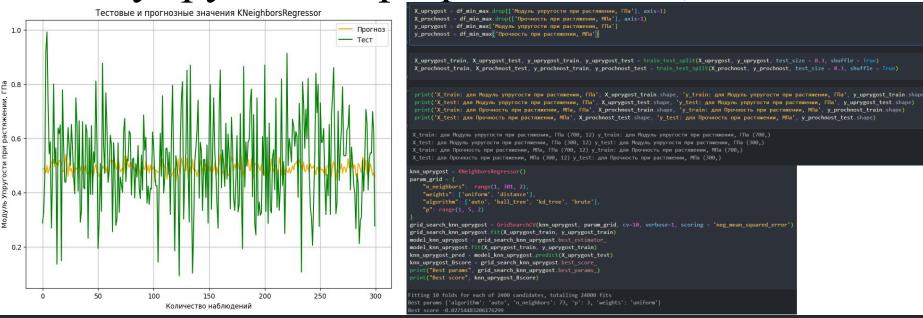


Разработка и обучение моделей для прогноза упругости при растяжении, ГПа

- Построение моделей
- Обучение моделей
- Вычисление ошибок
- Построение графиков
- Поиск гиперпараметро в методом GridSearchCV с перекрестной проверкой с количеством блоков 10

models_uprygost.T

• Подставление оптимальных параметров



MASE							
MAPE			0.349				
MSE							
				-0.040744			
models pr	rochnost.T						
	Модуль Прочность при растяжении	Модуля Прочность при растяжении	Модуль Прочность при растяжении	Модуль Прочность при растяжении	Модуль Прочность при растяжени	и Модуль Прочности при растяжении	Модуль Прочности при растяжении
Model		Модуля Прочность при растяжении LinearRegression_prochnost			Модуль Прочность при растяжени GradientBoostingRegressor_prochno		
	KNeighborsRegressor_prochnost					st MLPRegressor_prochnost	DecisionTreeRegressor_prochnost
Model	KNeighborsRegressor_prochnost 0.689	LinearRegression_prochnost	SGDRegressor_prochnost	RandomForestRegressor_prochnost	GradientBoostingRegressor_prochno	st MLPRegressor_prochnost 3 0.69	DecisionTreeRegressor_prochnost 0.701
Model MASE	KNeighborsRegressor_prochnost 0.689	LinearRegression_prochnost 0.697	SGDRegressor_prochnost 0.709	RandomForestRegressor_prochnost 0.692	GradientBoostingRegressor_prochno 0.73	st MLPRegressor_prochnost 3 0.69 nf inf	DecisionTreeRegressor_prochnost 0.701 inf
Model MASE MAPE	KNeighborsRegressor_prochnost 0.689 inf 0.03	LinearRegression_prochnost 0.697 inf	SGDRegressor_prochnost 0.709 inf 0.03	RandomForestRegressor_prochnost 0.692 inf	GradientBoostingRegressor_prochno 0.73 ii	st MLPRegressor_prochnost 3 0.69 of inf 2 0.03	DecisionTreeRegressor_prochnost 0.701 inf 0.03
Model MASE MAPE MSE	KNeighborsRegressor_prochnost 0.689 inf 0.03 -0.008	LinearRegression_prochnost 0.697 inf 0.03	SGDRegressor_prochnost 0.709 inf 0.03 -0.037	RandomForestRegressor_prochnost 0.692 inf 0.03	GradientBoostingRegressor_prochno 0.73 ir 0.03 -0.08	t MLPRegressor_prochnost 3 0,69 inf inf 2 0,03 3 -0,013	DecisionTreeRegressor_prochnost 0.701 inf 0.03 -0.031

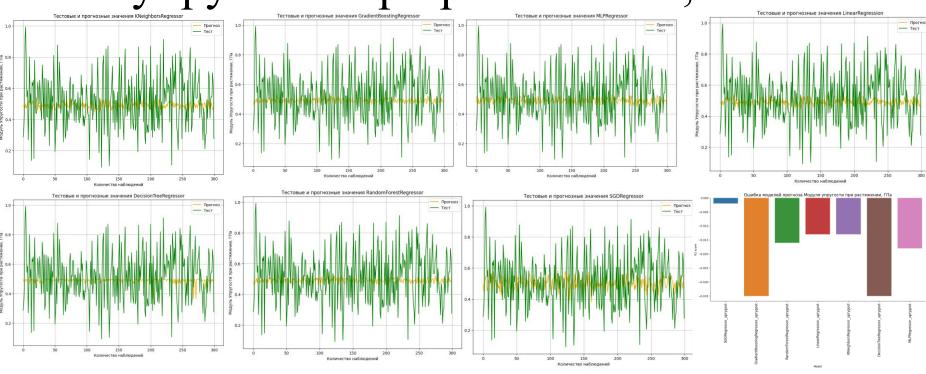
Модуль Упругости при растяжении Модуль Упругости при растяжении



Разработка и обучение моделей для прогноза упругости при растяжении, ГПа

Графики тестовых и прогнозных значений для разных методов

• График ошибок



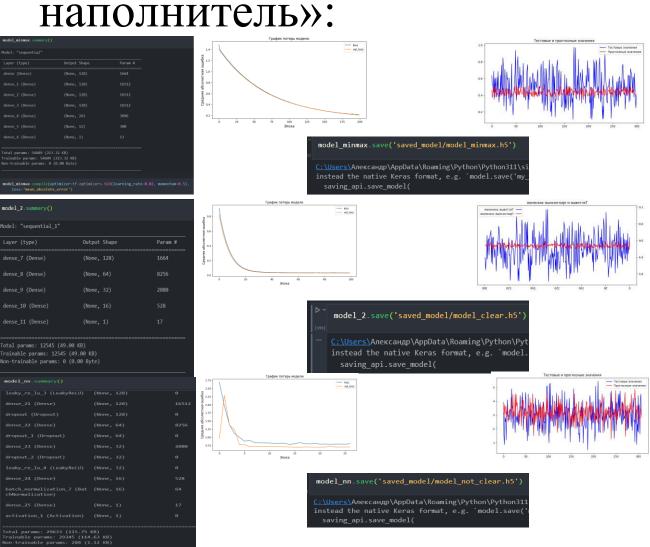
9



Нейронная сеть для соотношения «матрица-

- Сформируем входы и выходы для модели
- Разобьем на обучающую и тестовую выборки
- Построим модель и посмотрим на результаты
- Обучим нейросеть
- Сохраним модель







- Сохранил модель для разработки веб-приложения для прогнозирования соотношения «модуль упругости при растяжении" в фреймворке Flask
- При запуске приложения, пользователь переходит на: http://127.0.0.1:5000
- В открывшемся окне пользователю необходимо ввести в соответствующие ячейки требуемые значения и нажать на кнопку «Рссчитать».
- На выходе пользователь получает результат прогноза для значения параметра «Соотношение «матрица наполнитель»».

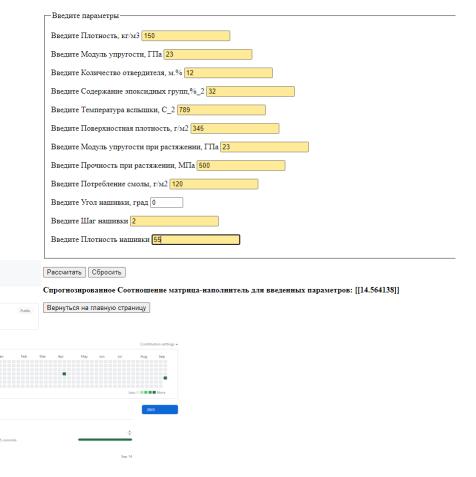
□ Overview □ Repositories 1 Projects ۞ Packages ☆ Stars

- Приложение успешно
- Репозиторий на github.com
- https://github.com/Matiunin1982 /VKR_Kompozit_Matiunin_AA/ tree/main

Приложение:

Created their first repository

Расчет соотношения матрица-наполнитель





Спасибо за внимание

Трудности и ошибки

- Опечатки, описки, пропуски скобок.
- Составление функций
- Когда что то не получалось или ломалась часть кода приходилось подолгу просматривать различные источники и много раз пробывать
- Самой большой трудностью было выкладывание на гитхаб, часть кода писал в гугл колабе, но приходилось писать и в VSCode, вот с ним то и пришлось помучиться когда нужно было выложить всю работу.
- Пробывал работать в PyCharm, но толи из за того что уже привык к VSCode писалось намного медленнее, хотя все приходит с опытом.



Спасибо за внимание

Заключение

- Использованные при разработке моделей подходы не позволили получить сколько-нибудь достоверных прогнозов
- Примененные модели регрессии не показали высокой эффективности в прогнозировании свойств композитов
- Невозможно определить из свойств материалов соотношение «матрица – наполнитель»
- Текущим набором алгоритмов текущая задача эффективно не решается.





do.bmstu.ru

